

---

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Kursus Semasa Cuti Panjang  
Sidang Akademik 2004/2005

Mei 2005

**KFT 331 – Kimia Fizik III**

Masa : 3 jam

---

Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi TUJUH muka surat yang bercetak sebelum anda memulakan peperiksaan ini.

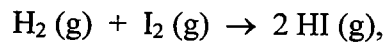
Jawab LIMA soalan sahaja.

Jika calon menjawab lebih daripada lima soalan, hanya lima soalan pertama mengikut susunan dalam jawapan akan diberi markah.

**Lampiran:** Pemalar Asas Dalam Kimia Fizik dilampirkan.

-2-

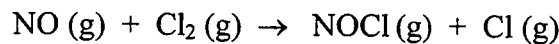
1. (a) Bagi tindak balas pada 700 K,



nilai garis pusat,  $\sigma = 2 \times 10^{-10}$  m dan tenaga pengaktifan ialah  $167 \text{ kJ mol}^{-1}$ . Kirakan pemalar kadar dengan menggunakan teori perlanggaran. Anggapkan bahawa faktor sterik,  $p = 1$ .

(10 markah)

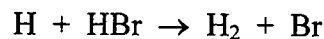
- (b) Pertimbangkan perlanggaran bimolekul yang berikut:



Garis pusat,  $\sigma = 0.35 \text{ nm}$ . Tentukan nilai faktor pra-eksponen untuk tindak balas ini sebagai fungsi T. Diberi faktor sterik bernilai 0.014.

(10 markah)

2. Pertimbangkan tindak balas berikut pada 300 K:



dengan data berikut:

Tenaga pengaktifan,  $E_0$  (daripada paras titik sifar) =  $5.0 \text{ kJ mol}^{-1}$

Jarak antara nukleus H – Br =  $141.4 \text{ pm}$

Nombor gelombang getaran H – Br =  $2650 \text{ cm}^{-1}$

Anggapkan kompleks yang diaktifkan adalah linear, dan data berikut diberi:

Jarak H – H =  $150 \text{ pm}$

Jarak H – Br =  $142 \text{ pm}$

Nombor gelombang untuk regangan simetri =  $2340 \text{ cm}^{-1}$

Nombor gelombang untuk dua getaran pembengkokan yang berdegenerat =  $460 \text{ cm}^{-1}$

Berdasarkan teori keadaan peralihan, kirakan

- (a) fungsi partisi bagi bahan tindak balas dan kompleks yang diaktifkan,

(14 markah)

...3/-

-3-

- (b) pemalar kadar pada 300 K untuk tindak balas itu.

(6 markah)

Diberikan:

$$q_t = \left( \frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} V$$

$$q_r = \frac{8\pi^2 IkT}{h^2}$$

$$q_v = \frac{1}{1 - e^{-h\nu/kT}}$$

3. (a) Berdasarkan mekanisme Michaelis-Menten untuk tindak balas pemangkinan enzim yang melibatkan satu substrat, S, terbitkan persamaan kadar awalnya. Seterusnya dapatkan persamaan Lineweaver-Burk.

(10 markah)

- (b) Kadar,  $v$ , berikut diperolehi untuk hidrolisis ATP yang dimangkinakan oleh miosin pada 25 °C dan pH 7.0.

$10^5 [\text{ATP}] / \text{mol dm}^{-3}$	7.5	12.5	20.0	32.5	62.5	155.0	320
$10^6 v / \text{mol dm}^{-3} \text{ s}^{-1}$	0.067	0.095	0.119	0.149	0.185	0.191	0.195

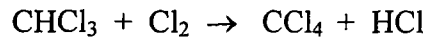
Tentukan pemalar Michaelis  $K_m$  dan kadar penghada  $v_m$ .

(10 markah)

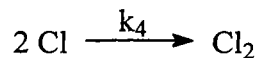
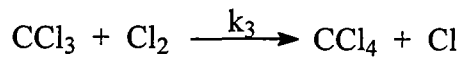
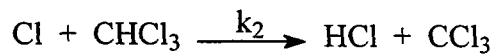
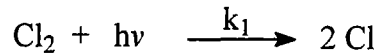
...4/-

-4-

4. (a) Tindak balas fotokimia di antara klorin dan kloroform dalam fasa gas mengikut persamaan stoikiometrik.



Mekanisme yang dicadangkan ialah



Anggapkan bahawa kadar pembentukan atom Cl dalam tindak balas permulaan ialah  $2I_a$ , bagi  $I_a$  ialah keamatan cahaya terserap. Dapatkan satu persamaan untuk kadar keseluruhan dalam sebutan  $I_a$  dan kepekatan  $\text{CHCl}_3$ .

(10 markah)

- (b) Tunjukkan bahawa

$$E = NkT^2 \left( \frac{\partial \ln q}{\partial T} \right)_v$$

dengan menggunakan takrifan bagi fungsi partisi dan  $E = \sum_i N_i \epsilon_i$ .

Carikan ungkapan bagi  $H$  dan  $C_p$ .

(10 markah)

...5/-

-5-

5. Bermula daripada  $S = k \ln \Omega$  dan diberikan tenaga dalam  $E = NkT^2 \left( \frac{\partial \ln q}{\partial T} \right)_v$ ,  
 tunjukkan bahawa entropi bagi zarah terkenalbezakan diberi dengan persamaan

$$S = NkT \left( \frac{\partial \ln q}{\partial T} \right)_v + Nk \ln q$$

Seterusnya, tunjukkan bahawa entropi getaran molar diberi dengan persamaan

$$\bar{S}_v = -R \ln(1 - e^{-x}) + \frac{Rx}{e^x - 1}$$

bagi  $x = \frac{h\nu}{kT}$ .

Kirakan sumbangan getaran kepada  $\bar{S}^\circ$  bagi  $O_2(g)$  pada 298.15 K. Frekuensi getaran adalah  $1580.246 \text{ cm}^{-1}$ .

Diberikan  $q_v = \frac{1}{1 - e^{-x}}$ .

(20 markah)

6. (a) Tentukan fungsi mana yang berikut adalah fungsi eigen bagi operator  $\frac{d^2}{dx^2}$ :

- (i)  $\sin 3x$
- (ii)  $5x^3$
- (iii)  $3e^{-5x}$
- (iv)  $\ln 2x$

(4 markah)

- (b) Diberikan operator  $\hat{A} = x$  dan  $\hat{B} = \frac{d}{dx}$ ,  
 tentukan

- (i)  $\hat{A}\hat{B}f(x)$  dan  $\hat{B}\hat{A}f(x)$
- (ii) Komutator  $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ .

(6 markah)

- (c) Buktikan bahawa terdapat satu set fungsi eigen lengkap yang umum bagi dua operator yang bertukar tertib.

(10 markah)

...6/-

-6-

7. (a) Apakah yang dimaksudkan dengan Prinsip Kepadanan? Berikan satu contoh untuk menjelaskan hujah anda.

(10 markah)

- (b) Pertimbangkan satu zarah di dalam sebuah kotak satu dimensi. Tenaga keupayaan,  $U = 0$  apabila  $0 \leq x \leq a$  dan  $U = \infty$  di tempat lain. Fungsi gelombang yang dibenarkan bagi keadaan asas adalah

$$\Psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a}.$$

Carikan ketidakpastian momentum  $\Delta p_x$  yang ditakrifkan dengan  $\Delta p_x = (\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2)^{1/2}$ .

(10 markah)

-oooOooo-

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA  
Pusat Pengajian Sains Kimia

Pemalar Asas dalam Kimia Fizik

<u>Simbol</u>	<u>Keterangan</u>	<u>Nilai</u>
$N_A$	Nombor Avogadro	$6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
$F$	Pemalar Faraday	$96,500 \text{ C mol}^{-1}$ , atau coulomb per mol, elektron
$e$	Cas elektron	$4.80 \times 10^{-10} \text{ esu}$ $1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$ atau coulomb
$m_e$	Jisim elektron	$9.11 \times 10^{-28} \text{ g}$ $9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$
$m_p$	Jisim proton	$1.67 \times 10^{-24} \text{ g}$ $1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$
$h$	Pemalar Planck	$6.626 \times 10^{-27} \text{ erg s}$ $6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$
$c$	Halaju cahaya	$3.0 \times 10^{10} \text{ cm s}^{-1}$ $3.0 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$
$R$	Pemalar gas	$8.314 \times 10^7 \text{ erg K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $8.314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $0.082 \text{ l atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $1.987 \text{ cal K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
$k$	Pemalar Boltzmann	$1.380 \times 10^{-16} \text{ erg K}^{-1} \text{ molekul}^{-1}$ $1.380 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \text{ molekul}^{-1}$
$g$		$981 \text{ cm s}^{-2}$ $9.81 \text{ m s}^{-2}$
1 atm		$76 \text{ cmHg}$ $1.013 \times 10^6 \text{ dyne cm}^{-2}$ $101,325 \text{ N m}^{-2}$
$2.303 \frac{RT}{F}$		$0.0591 \text{ V}$ , atau volt, pada $25^\circ \text{C}$

Berat Atom yang Berguna

H = 1.0	C = 12.0	I = 126.9	Fe = 55.8	As = 74.9
Br = 79.9	Cl = 35.5	Ag = 107.9	Pb = 207.0	Xe = 131.1
Na = 23.0	K = 39.1	N = 14.0	Cu = 63.5	F = 19.0
O = 16.0	S = 32.0	P = 31.0	Ca = 40.1	Mg = 24.0
Sn = 118.7	Cs = 132.9	W = 183.85		